بسمه تعالی

آزمایشـــگاه مدل ســـازی اتمی و شـــبیه ســـازی مواد پیشـــرفته (Atomistic Modelling and Advanced Materials Simulation: AMAMS) در سـال ۱۳۹۲ تاسیس شده و هدف از تاسیس آن ایجاد آزمایشگاه محاسباتی به منظور شبیه سازی، مـدل ســـازی، طراحی رفتـار بـدیع مواد بـه انواع روش‌ها از جمله رهیافت‌های مکانیک کوانتمی مانند نظریه‌ی تابعی چگالی، کار-پارینلو، مونت کارلوی کوانتمی و روش‌های نیمه تحلیلی و رهیافت های کلاسیکی مانند دینامیک ملکولی، مونت کارلو و ... است.

در این آزمایشـگاه تجهیزات محاسـباتی مورد نظر برای مقاصـد مذکور فراهم آماده اسـت به طوری که در حال حاضـر ۶۰ هسته‌ی پردازشی در قالب دو سرور محاسباتی و رایانه‌های رومیزی در این آزمایشگاه در حال انجام محاسبات هستند.

همین طور جهت انجام محاسـبات لیسـانس نرم‌افزارهای مورد نیاز از جمله کد محاسباتی بسیار مهم Wien2k که از دقیق‌ترین و سریعترین کدهای محاسبات کوانتمی نظریه‌ی تابعی چگالی است خریداری شده است.

مسـئولیت این آزمایشـگاه برعهده‌ی دکتر علی توانا اسـت و از بدو تاسـیس تا کنون ۱۵ دانشجوی کارشناسی ارشد و سه دانشجوی دکترای تخصصی فیزیک در این آزمایشگاه مشغول به پژوهشند یا فارغ التحصیل شده اند.

از جمله موضوعاتی که در سال‌های گذشته در این آزمایشگاه مورد بررسی قرار گرفته اند به موارد زیر می‌توان اشاره کرد:

- خواص مغناطومکانیکی آلیاژهای هویسلر

- خواص ترابردی ادوات اسپینترونیکی مغناطیسی

- فازهای ساختاری کوپرات‌های ابررسانا

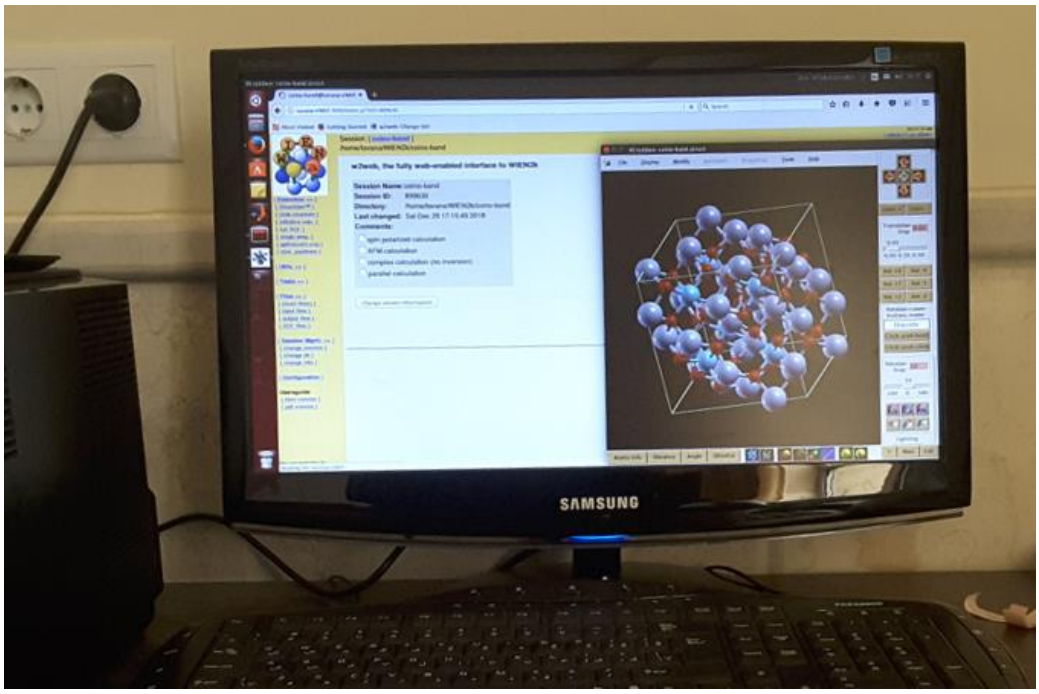
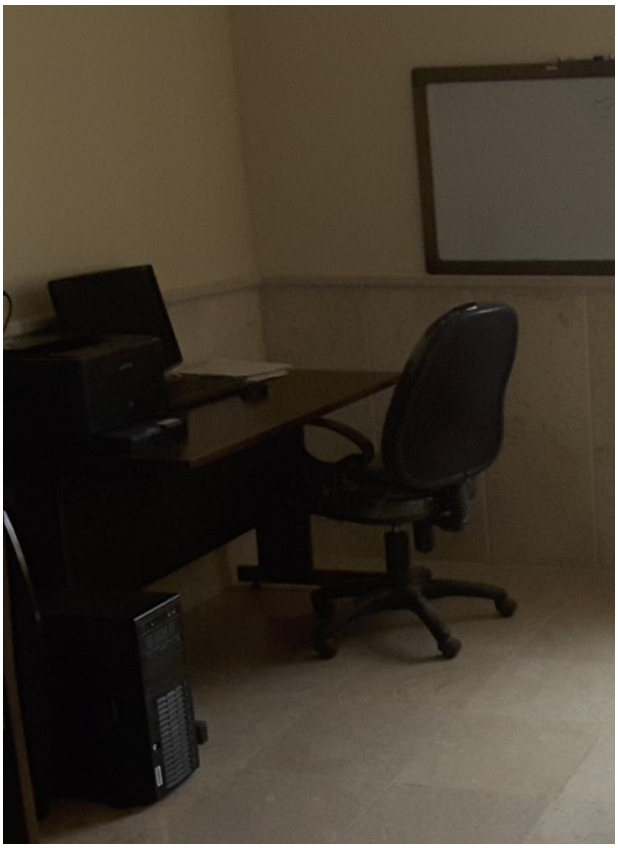
- مطالعه ساختار الکترونی و اپتیکی نیمه هادی‌ها بر اساس رهیافت‌های مدرن

- مطالعه اتصالات ناهمگون در فوتو کاتالیست‌ها

- نظم‌های مغناطیسی غیرهمخط در مواد مغناطیسی توپولوژیک و لایه‌های نازک

- عایق‌های توپولوژیک و اثرات ساختار بلوری

و ...


SAMSUNG